Index

Commentationes et Relationes

Amos, A. T., Burrows, B. L.: Perturbation Theory for Excited States of Molecules. I . . 283
Ažman, A., s. Lukman, B., et al. 396

Barriol, J., s. Rinaldi, D., et al. 291
Beveridge, D. L., s. Kang, S. 312
Bollini, C. G., Giambiagi, J. J., Giambiagi, M., Segre de Giambiagi, M.: Interaction Independent π Bond Orders for Certain Excited States 234
Brown, R. D., Burden, F. R., Hart, B. T.: Merged Gaussian Lobe Basis SCFMO Calculations 214
Brustolon, M., Corvaja, C., Giacometti, G.: Theoretical Study of the Variations in the β-Protons Hyperfine Splitting Parameter of Hydrocarbon Radicals 90
Burden, F. R., s. Brown, R. D., et al. 214
Burrows, B. L., s. Amos, A. T. 283

Cheney, B. V., s. Maggiora, G. M., et al. 337
Chojnacki, H.: All-Valence MO Study of Hydrogen Bonding in Water 309
Cho, M.-H., s. Kang, S. 176
Christoffersen, R. E., s. Maggiora, G. M., et al. 337
Chun, H.-U., s. Papula, L., et al. 149
Cignitti, M., Paoloni, L.: A CNDO/2 Investigation on Linear Chains of Symmetrically Bonded Water Molecules 250
Claxton, T. A., Smith, N. A.: Small Gaussian Basis Sets for Second-Row Atoms 378
— — Comparison of Minimization Procedures for UHF Wave Functions 399
Cook, D. B., Dacre, P. D., Dodds, J. L., Elder, M.: Use of the Mixed Basis Method for *ab initio* SCF MO Calculations 167
Corvaja, C., s. Brustolon, M., et al. 90
Coubeils, J. L., s. Pullman, B., et al. 11
Courriere, P., s. Pullmann, B., et al. 11
Csizmadia, I. G., s. Kari, R. E. 1

Dacre, P. D., s. Cook, D. B., et al. 167
Das, T. P., s. Han, P. S., et al. 261
Dodds, J. L., s. Cook, D. B., et al. 167
Dugre, D. H., s. Fitzgerald, R. J. 361

Eckert-Maksić, M., s. Maksić, Z. B., et al. 70
Elder, M., s. Cook, D. B., et al. 167
England, W., Ruedenberg, K.: Localized π-Orbitals, Pauling Bond Orders, and the Origin of Aromatic Stability 196

Fitzgerald, R. J., Dugre, D. H.: Extended Hückel Calculations of Negative Spin Density 361

Gebelein, H., s. Hartmann, H. 39
Genson, D. W., s. Maggiora, G. M., et al. 337
Giacometti, G., s. Brustolon, M., et al. 90
Giambiagi, J. J., s. Bollini, C. G., et al. 234
Giambiagi, M., s. Bollini, C. G., et al. 234
Gilbert, M., s. Langlet, J., et al. 45

Han, P. S., Rettig, M. F., Ikenberry, D., Das, T. P.: Extended Hückel Treatment of the Fe^{57m} Nuclear Quadrupole Interaction in Hemin 261
Hart, B. T., s. Brown, R. D., et al. 214
Hartmann, H., Gebelein, H.: Ionisationspotentiale des Methans 39
Higuchi, J., Ito, T.: Photochemical Dimerization of *p*-Benzoquinone Methyl Derivatives in Crystals 61
Hirst, D. M., Linington, M. E.: The Method of Non-Paired Spatial Orbitals: Naphthalene and Azulene 315
Hooydonk, G. Van: Calculation of Bond Energies in Diatomic Molecules 157
Hoyland, J. R.: MINDO/2 Calculations on the Reaction of Methyl Radicals with Ethylene and Butadiene 229

IKENBERRY, D., s. HAN, P.S., et al. . . . 261
ITO, T., s. HIGUCHI, J. . . . 61

JULG, A., JULG, O.: Relation générale entre l'indice de liaison et la distance interatomique dans les molécules conjuguées, planes et linéaires . . . 353
JULG, O., s. JULG, A. . . . 353
JUNGEN, M.: Das „Floating Gaussian Orbital"-Modell als Hilfsmittel zur Interpretation von Photoelektronen-Spektren . . . 255

KANG, S., CHO, M.-H.: Conformational Analysis of 5-Hydroxytryptamine and Its Cation: Ψ, Φ-Energy Contour Diagram by the INDO Molecular Orbital Method . . . 176
— BEVERIDGE, D. L.: Molecular Orbital Aspects of Substituent Effects . . . 312
KARI, R. E., CSIZMADIA, I. G.: A Comparison of One-Electron Properties Calculated from Gaussian SCF and CI Wavefunctions . . . 1
KETTLE, S. F. A., REYNOLDS, D. J.: The Electronic Structure of the Boron Hydrides. Part IV. The Atomic Orbital Composition of Topological Bases . . . 239
KIKUCHI, O., s. MORIKAWA, T., et al. . . . 224
KLOPMAN, G., POLÁK, R.: Semiempirical SCF Theory with "Scaled" Slater Orbitals. I. Atoms . . . 130
KOCHANSKI, E., LEHN, J. M., LEVY, B.: Non-Empirical Interpretation of Nitrogen 14 Nuclear Quadrupole Coupling Constants . . . 111
KOLLER, J., s. LUKMAN, B., et al. . . . 396
KÖNIG, E., KREMER, S.: Theory of Magnetism Close to the $^5T_2 - {}^1A_1$ Crossover in Iron(II) Complexes. II. Full Configuration Interaction Calculation in a Cubic Field . . . 45
KREMER, S., s. KÖNIG, E. . . . 45
KVASNIČKA, V., s. ROSMUS, P., et al. . . . 142

LANGLET, J., GILBERT, M., MALRIEU, J.-P.: Extension of the PCILO-Method to the Localized Free Radicals . . . 80
LEHN, J. M., s. KOCHANSKI, E., et al. . . . 111
LEVY, B. s. KOCHANSKI, E., et al. . . . 111
LININGTON, M. E., s. HIRST, D. M. . . . 315
LUKMAN, B., KOLLER, J., AŽMAN, A.: Separated Pair Theory *via* Girardeau's Hamiltonian . . . 396

MAGGIORA, G. M., GENSON, D. W., CHRISTOFFERSEN, R. E., CHENEY, B. V.: *Ab Initio* Calculations on Large Molecules Using Molecular Fragments. First Order Electronic Properties for Hydrocarbons . . . 337
MAKSIĆ, Z. B., ECKERT-MAKSIĆ, M., RANDIĆ, M.: Correlation between C-H and C-C Spin-Spin Coupling Constants and *s* Character of Hybrids Calculated by the Maximum Overlap Method . . . 70
MALRIEU, J.-P., s. LANGLET, J., et al. . . . 80
MCALOON, B. J., PERKINS, P. G.: Calculations on Some Phosphate Ions by a Modified CNDO Method . . . 304
MEYER, A. Y.: Multi-Conformational Compounds with Two Absorbing Groups. VI. Cyclopropane . . . 271
MORIKAWA, T., KIKUCHI, O., SOMENO, K.: SCF MO INDO Calculation of *g*-Tensors of Some σ-Type Radicals . . . 224
MURTHY, A. S. N., s. RAO, C. N. R. . . . 392

NANDA, D. N., SUBRAMANIAN, J., NARASIMHAN, P. T.: Unrestricted Hartree-Fock Spin Density Distributions in Nitro Aromatic Radical Anions . . . 369
NARASIMHAN, P. T., s. NANDA, D. N., et al. . . . 369

PAOLONI, L., s. CIGNITTI, M. . . . 250
PAPULA, L., STREHL, W., CHUN, H.-U.: Bestimmung der Atomladungen in Molekülen aus der Verschiebung der $K_{\alpha 1}/_{\alpha 3}$-Hauptlinie und ihrer Satellitenlinien für Elemente der 3. Periode . . . 149
PERAHIA, D., s. PULLMANN, B., et al. . . . 11
PERKINS, P. G., ROBERTSON, I. C., SCOTT, J. M.: The Electronic State of Butadiene Bonded to an Iron Tricarbonyl Residue . . . 299
— s. MCALOON, B. J. . . . 304
POLÁK, R., s. KLOPMAN, G. . . . 130
PULLMAN, B., COUBEILS, J. L., COURRIERE, P., PERAHIA, D.: Molecular Orbital Calculations on the Conformation of Polypeptides and Proteins. IX. The Conformational Energy Maps of the Lysyl and Arginyl Residues . . . 11

RANDIĆ, M., s. MAKSIĆ, Z. B., et al. 70
RAO, C. N. R., MURTHY, A. S. N.: Hydrogen Bonding in Electronically Excited States of Molecules 392
RAY, N. K., SHARMA, K. K.: Spin Density Distributions in Some Radical Anions Exhibiting Restricted Rotation about a Carbon-Carbon Bond 403
RETTIG, M. F., s. HAN, P. S., et al. 261
REYNOLDS, D. J. s. KETTLE, S. F. A. 239
RINALDI, D., RIVAIL, J.-L., BARRIOL, J.: Analyse de population dans les calculs LCAO: charges et moments atomiques 291
RIVAIL, J.-L., s. RINALDI, D., et al. 291
ROBERTS, G., WARREN, K. D.: SCF-π-Electron Calculations Using Orthogonalised Atomic Orbitals 184
ROBERTS, H. G. Ff.: On the Chemical Shifts in Conjugated Systems 105
ROBERTSON, I. C., s. PERKINS, P. G., et al. 299
ROSMUS, P., VOJTÍK, J., KVASNIČKA, V.: Eine vollständige CNDO/2-CI Berechnung von H_2O und H_2O^+ 142
RUEDENBERG, K., s. ENGLAND, W. 196

SALAHUB, D. R.: Semi-Empirical MO-CI Calculations on Excited States. III. Saturated Molecules 325
— Semi-Empirical MO-CI Calculations on Excited States. IV. Unsaturated Molecules 330
SATURNO, A. F., s. STRICKLAND, R. W. 386
SCOTT, J. M., s. PERKINS, P. G., et al. 299
SEGRE DE GIAMBIAGI, M., s. BOLLINI, C. G., et al. 234
SHARMA, K. K., s. RAY, N. K. 403
SMITH, N. A., s. CLAXTON, T. A. 378
— s. CLAXTON, T. A. 399
SOMENO, K., s. MORIKAWA, T., et al. 224
STREHL, W., s. PAPULA, L., et al. 149
STRICKLAND, R. W., SATURNO, A. F.: Angularly Correlated Two-Electron Repulsion Operators. I. One- and Two-Center Integrals 386
SUBRAMANIAN, J., s. NANDA, D. N., et al. 369

VOJTÍK, J., s. ROSMUS, P., et al. 142

WARREN, K. D., s. ROBERTS, G. 184

YUE, C. P.: On the Use of $T_H[1s]$ and $1s$ Functions as Expansion Functions 407

ZEMKE, W. T.: σ-π Sparation: Excited H_2 as a Model System 23

Recensiones

LEFEBVRE, R., MOSER, C.: Correlation Effects in Atoms and Molecules, Advances in Chemical Physics XIV (Ref. K. JUG) 109

KLOPMAN, G., O'LEARY, B.: All-Valence Electrons SCF Calculations of Large Organic Molecules (Ref. D. L. BEVERIDGE) 110

Indexed in Current Contents

Theoretica Chimica Acta

For speedy publication, this journal is issued at frequent intervals, according to the amount of material received, 4 issues normally constituting one volume. Price per volume: DM 120.—.

It is a fundamental condition that manuscripts submitted should not have been published elsewhere, in this or any other country. The author must undertake not to publish elsewhere at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries, including all rights of photocopying or reproduction by any other method.

The use in this journal of registered or trade names, trademarks etc. without special acknowledgement does not imply that such names, as defined, by the relevant protection laws, may be regarded as unprotected and thus free for general use.

Die Zeitschrift erscheint, um eine rasche Publikation zu ermöglichen, in einzelnen Heften die zu Bänden vereinigt werden. Ein Band besteht im allgemeinen aus 4 Heften. Der Preis eines Bandes beträgt DM 120,—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,40 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît à de courts intervalles, suivant les articles reçus. En général un volume se compose de 4 fascicules. Le prix de chaque volume est de 120 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscript accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que des ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . . , des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis pas la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

THEORETICA CHIMICA ACTA

Vol. 22 Fasc. 4

Commentationes

HIRST, D. M., LININGTON, M. E.: The Method of Non-Paired Spatial Orbitals: Naphthalene and Azulene 315

SALAHUB, D. R.: Semi-Empirical MO-CI Calculations on Excited States. III. Saturated Molecules 325

SALAHUB, D. R.: Semi-Empirical MO-CI Calculations on Excited States. IV. Unsaturated Molecules 330

MAGGIORA, G. M., GENSON, D. W., CHRISTOFFERSEN, R. E., CHENEY, B. V.: *Ab Initio* Calculations on Large Molecules Using Molecular Fragments. First Order Electronic Properties for Hydrocarbons 337

JULG, A., JULG, O.: Relation générale entre l'indice de liaison et la distance interatomique dans les molécules conjuguées, planes et linéaires 353

General Relation between Bond Order and Bond Distance in Conjugated Planar and Linear Molecules

FITZGERALD, R. J., DUGRE, D. H.: Extended Hückel Calculations of Negative Spin Density 361

NANDA, D. N., SUBRAMANIAN, J., NARASIMHAN, P. T.: Unrestricted Hartree-Fock Spin Density Distributions in Nitro Aromatic Radical Anions 369

CLAXTON, T. A., SMITH, N. A.: Small Gaussian Basis Sets for Second-Row Atoms 378

STRICKLAND, R. W., SATURNO, A. F.: Angularly Correlated Two-Electron Repulsion Operators. I. One- and Two-Center Integrals 386

Relationes

RAO, C. N. R., MURTHY, A. S. N.: Hydrogen Bonding in Electronically Excited States of Molecules 392

LUKMAN, B., KOLLER, J., AŽMAN, A.: Separated Pair Theory *via* Girardeau's Hamiltonian 396

CLAXTON, T. A., SMITH, N. A.: Comparison of Minimization Procedures for UHF Wave Functions 399

RAY, N. K., SHARMA, K. K.: Spin Density Distributions in Some Radical Anions Exhibiting Restricted Rotation about a Carbon-Carbon Bond 403

YUE, C. P.: On the Use of $T_H[1s]$ and $1s$ Functions as Expansion Functions 407

Indexed in Current Contents

Responsible for advertisements: Edgar Seidler, D-1000 Berlin 15, Kurfürstendamm 237

Telephone (0311) 883 37 55, Telex: 01-82 811

Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York

Printed in Germany by Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen

© by Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1971